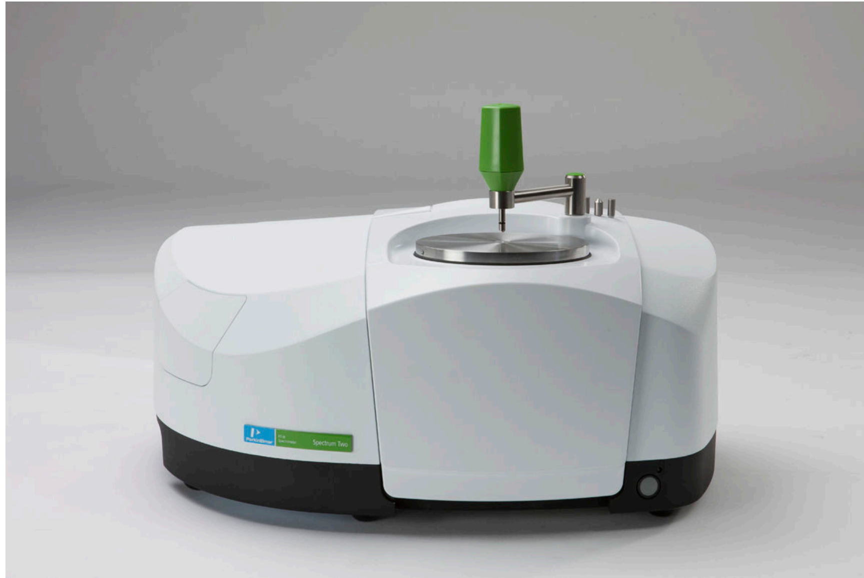
MODE D'EMPLOI DE BASE DU SPECTRUM TWO



Acquisition d'un spectre

- Cliquer sur l'icône du bureau « spectrum ».

- En haut à gauche de la fenêtre qui s'ouvre, entrer les paramètres désirés : *gamme de nombre d'onde*, *résolution* et *accumulations* (= nombre de scans).

- En haut au milieu de la fenêtre, entrer le *nom de l'échantillon* à analyser et sa *description* si nécessaire.

- Dans la partie basse de la fenêtre,

  - Dans l'onglet « paramétrage-acquisition des données », entrer si nécessaire le chemin d'accès vers le dossier dans lequel sera stocké le spectre.
  - Dans l'onglet « paramétrage-opérations de base », vérifier le mode d'affichage (abscisse, ordonnée) du spectre.

- Faire le background (sans échantillon !) en cliquant sur l'icône « background ».

- Placer l'échantillon puis cliquer sur l'icône « Analyse ». Si le mot « aperçu » est coché, le logiciel présente une vue du spectre de l'échantillon. Pour acquérir véritablement le spectre et l'enregistrer, cliquer à nouveau sur « analyse ».

- **Correction de ligne de base :** Cliquer sur : Traitement → Correction de ligne de base.

Analyse quantitative par la loi de Beer - Lambert

- Acquérir les spectres qui serviront à la courbe d'étalonnage.
- Acquérir le (ou les) spectre(s) de(s) (l')échantillon(s) à doser.
- Dans le bureau, cliquer sur l'icône « spectrum Quant ».
- A gauche, cliquer sur « New method » et donner un nom à la méthode à créer dans la fenêtre principale.
- Cliquer sur *standards* puis sur l'onglet « Add standards ». Ajouter les différents spectres étalons.
- Dans le tableau, cliquer droit sur *properties* et renommer en précisant le nom (C) et l'unité ($mol.l^{-1}$ ou % …) de l'abscisse de la droite d'étalonnage.
- Entrer les valeurs des concentrations des étalons.
- Cliquer sur *algorithm*, vérifier que le choix *Beer's law* est sélectionné puis cliquer sur l'onglet « Beer's law ».
- Choisir la grandeur utilisée en ordonnée dans la courbe d'étalonnage :

  - *Height* : donne la valeur de l'absorbance correspondant à la hauteur d'un pic sélectionné.
  - *Max height* : donne la valeur de l'absorbance correspondant à la hauteur du plus grand pic d'une zone sélectionnée.
  - *Area* : donne la valeur de l'aire située sous un pic sélectionné.
  - *base 1* et *base 2* permettent d'encadrer le pic ou la zone sélectionné.

- Dans « select spectrum for parameter display », pour chaque spectre étalon, choisir le même pic (ou la même zone) et relever la valeur (height, max height ou area) correspondante.
- Cliquer ensuite sur l'icône « calibrate », remplir ce qui est demandé.
- Cliquer sur *review* pour visualiser la courbe d'étalonnage.
- Cliquer sur *prediction*, puis sur « Add samples ».Charger le (ou les) spectre(s) de(s) (l')échantillon(s) à doser.
- Cliquer sur *predict* et la valeur de la concentration de(s) (l')échantillon(s) à doser apparaît.